

量子化学計算による有機分子の Ramanスペクトルシミュレーション

振動スペクトルシミュレーションによって分子構造の情報が得られます

測定法 : 計算科学・データ解析、Raman

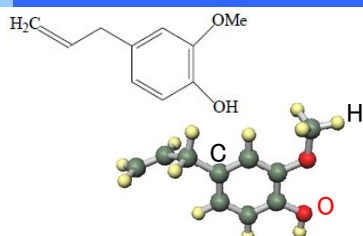
製品分野 : 医薬品、化粧品

分析目的 : 化学結合状態評価、構造評価

概要

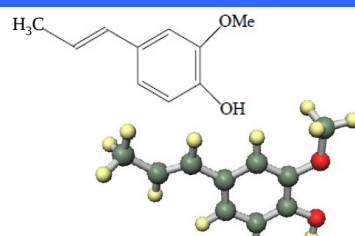
オイゲノール(eugenol)は香料、殺菌剤や麻酔薬などの医薬品に用いられます。その構造異性体であるイソオイゲノール(isoeugenol)はバニリンの工業的生産や香料の調合剤に用いられます。本資料ではオイゲノールとイソオイゲノールを対象として、量子化学計算によってRamanスペクトルシミュレーションを行った事例を紹介します。今回のようなシミュレーション結果を実測データと比較することで構造情報が得られ、構造異性体の識別も可能です。また、その構造の安定性や電子状態も議論することができます。

データ



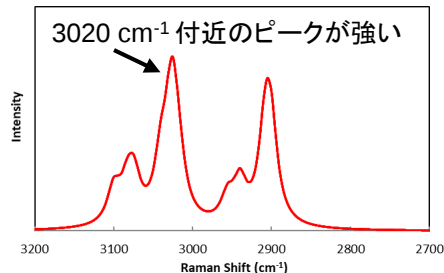
オイゲノール

側鎖の構造が異なる
2種の異性体



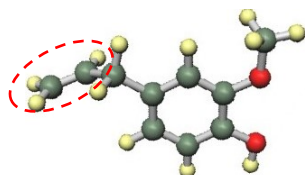
イソオイゲノール

■ シミュレーションで得られたRamanスペクトル

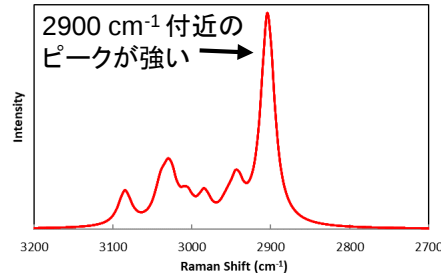


3020 cm⁻¹ 付近のピークが強い

ビニル基の伸縮振動に対応

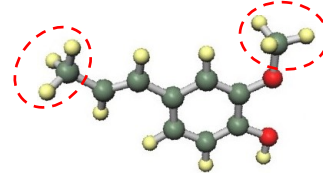


分子構造が異なると
スペクトル形状も異なる

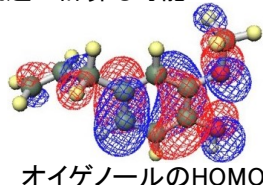


2900 cm⁻¹ 付近の
ピークが強い

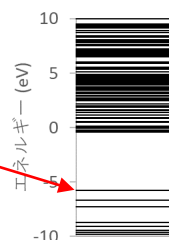
メチル基の伸縮振動に対応



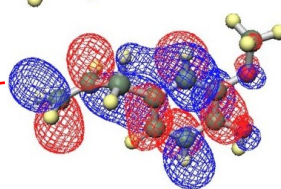
・分子軌道の計算も可能



オイゲノールのHOMO



分子軌道
(HOMO-LUMO近傍)
のエネルギー準位図



オイゲノールのLUMO

- ✓ 振動スペクトルの実測データとシミュレーション結果の比較から構造情報が得られます。また、構造異性体の識別も可能です。
- ✓ 同定した分子構造の安定性や電荷分布、分極、分子軌道エネルギーなどの情報も得られます。
- ✓ データベースに無い新規材料分子に対しても、候補構造からシミュレーションを行えます。

分析サービスで、あなたの研究開発を強力サポート！

一般財団法人
MIST 材料科学技術振興財団

TEL : 03-3749-2525 E-mail : info@mst.or.jp
URL : <https://www.mst.or.jp/>